УДК 519.6

ОСОБЕННОСТИ РЕШЕНИЯ СТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ КОНВЕКЦИИ-ДИФФУЗИИ-РЕАКЦИИ С ОТРИЦАТЕЛЬНЫМ КОЭФИЦИЕНТОМ РЕАКЦИИ[1)]

Л.А. КРУКИЕР, Б.Л. КРУКИЕР

Южный федеральный университет
E-mail krukier@sfedu.ru; bk@sfedu.ru

FEATURES OF SOLUTIONS OF THE STEADY CONVECTION-DIFFUSION-REACTION EQUATION WITH NEGATIVE REACTION COEFFICIENT

L.A. KRUKIER, B.L. KRUKIER

Southern Federal University

Аннотация

Рассматривается стационарная задача конвекции-диффузии-реакции с отрицательным коэффициентом реакции. Показано, что при центрально-разностной аппроксимации задачи пространственный оператор сохраняет спектр в правой полуплоскости для некоторого интервала отрицательных коэффициентов реакции.

Ключевые слова: Стационарное уравнения конвекции-диффузии-реакции, отрицательный коэффициент реакции

Summary

Steady convection-diffusion-reaction equation with negative coefficient of reaction has been considered. It was shown, that central finite difference approximation saves spectrum in right half plane for some negative reaction coefficient.

Key words: The steady convection-diffusion-reaction equation, negative coefficient of reaction

---

Введение

Базовыми моделями проблем механики сплошной среды являются краевые задачи для нестационарных и стационарных уравнений конвекции-диффузии-реакции (КДР). Для их исследования привлекаются различные численные методы. После конечно-разностной, конечно-элементной или конечно-объемной аппроксимации по пространству мы приходим в случае нестационарной задачи к задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений, а при аппроксимации стационарной задачи сразу получаем систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). Основные особенности этих задач, в обоих случаях, связаны с несимметричностью оператора задачи по пространству и его знаконеопределенностью [1].

Конвективно-диффузионный перенос и учет химических реакций играет определяющую роль во многих процессах переноса субстанции в движущейся среде. В качестве базовых математических моделей при его описании выступают краевые задачи "конвекции-диффузии-реакции" . Доминирование конвекции над диффузией, а также возможная несогласованность краевых условий и правой части уравнения делают возможным появление в расчетной области локальных областей с большими градиентами искомой функции — пограничных и внутренних переходных слоев. Наличие источников и стоков в химически

[1)] Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты 12-01-00022-а, 14-01-13076 мол-а)

реагирующих потоках вносит дополнительные сложности в картину процесса. В конечном счете это приводит к серьезным трудностям при численном решении математических моделей.

Одна из трудностей связана с различным масштабом процессов диффузии и конвекции. В математическом отношении это означает появление в краевой задаче малого параметра при старшей производной. Его стремление к нулю приводит к неограниченному росту производной и при не-согласованности краевых условий с правой частью, порождает сингулярно возмущенную задачу [2]. Практические потребности решения таких задач дали импульс к их исследованию и разработке специальных вычислительных технологий, обеспечивающих необходимый порядок точности приближен-ного решения и имеющих разумные требования к ресурсам. Очевидно, что основой для численных исследований этого класса задач является правильно построенная в области расчета сетка. Данной проблеме посвящено большое количество работ [2–4]. Вместе с тем, даже если в областях расчета не возникают внутренние или пограничные слои, в работах [5,6] было показано, что получаемые в результате центрально-разностной аппроксимации СЛАУ обладают рядом не очень хороших свойств при доминировании конвекции: потеря свойства диагонального преобладания для матрицы системы, очень важная для сходимости итерационных методов, и сильная несимметрия системы, т.е. преобладания нормы кососимметричной части матрицы над нормой симметричной ее части. Вместе с тем, использование при аппроксимации конвективных членов разностей "против потока"приводит к системам с М-матрицами [7], что хорошо для итерационных методов (сохраняется свойство диагонального преобладания), но сильно размывает численное решение за счет схемной вязкости, что при больших числах Пекле недопустимо, т.к в этом случае численная схемная вязкость превышает физическую [8]. Наиболее полно проблема решения задачи конвекции-диффузии рассмотрена в монографиях [9] и [10].

1. Уравнение конвекции-диффузии-реакции и его особенности

Рассмотрим двухмерную краевую задачу КДР в квадрате $\Omega = [0,1]*[0,1]$ с краевыми условиями 1-го рода. Уравнение КДР запишем в симметричной форме [11]

$$\frac{1}{Pe}\Delta C + \frac{1}{2}\left(u\frac{\partial\, C}{\partial\, x} + \frac{\partial\ (uC)}{\partial\, x} + v\frac{\partial\, C}{\partial\, y} + \frac{\partial\ (vC)}{\partial\, y}\right) + \alpha C = f(x,y), \tag{1}$$

$$C|_{\,\delta\Omega} = C_{gr}, \tag{2}$$

$$\mathrm{d\vec{i}v}\,\tilde{U} = 0, \tag{3}$$

где Pe – число Пекле, $\tilde{U} = \{U,V\}$ – поле скоростей в Ω, C – неизвестная функция, α – коэффициент реакции ($\alpha = 0$ означает, что величина C консервативна), $\mathrm{d\vec{i}v}\,\tilde{U} = 0$ означает, что среда несжимаема, f – правая часть уравнения, $\delta\Omega$ – граница области Ω, C_{gr} – значение функции решения на границе $\delta\Omega$ (как правило $C_{gr} = 0$ в силу подстановки $\tilde{C} = C - C_{gr}$ и линейности уравнения (1))

Задача (1)–(3) появляется во многих областях исследований, как в прямом виде, так и как часть более общей задачи, например, уравнения Навье-Стокса. Как правило, задача КДР рассматривается при условии, что $\alpha \geqslant 0$ [9]. Вместе с тем, ограничения на знак коэффициента реакции связаны не с сущностью задачи, а с возможностью ее решать численно, т.к. в этом случае спектр разностного оператора может перейти в левую полуплоскость, у него могут появиться нулевые собственные числа и он потеряет очень важное для сходимости итерационных методов свойство знакоопределенности.

Рассмотрим случай с $\alpha < 0$. Отметим, что в случае регулярной области Ω, краевых условий 1 рода и равномерной сетке в области собственные вектора и собственные числа разностного аналога оператора

$$L_h = -\frac{1}{Pe}\Delta_h + \alpha \tag{4}$$

известны [12, 13] и имеют следующий вид:

$$\lambda_{mp}(L_h) = \frac{4}{Peh^2}\left(\sin^2\frac{m\pi h}{2} + \sin^2\frac{p\pi h}{2}\right) + \alpha,$$

$$m = 1, 2, \ldots n-1; p = 1, 2, \ldots n-1,$$

$$\frac{2\pi^2}{Pe} + \alpha \leqslant \lambda_i \leqslant \frac{8}{Peh^2} + \alpha,$$
$$i = 1, 2, \dots N, N = (n-1) * (n-1).$$

Отсюда сразу следует, что при $\alpha \leqslant -\dfrac{2\pi^2}{Pe}$ разностный оператор, соответствующий членам диффузии и реакции будет терять свойство знакопостоянства и его спектр частично уходит в левую полуплоскость. Таким образом, получаем следующую теорему

Теорема 1. *При центрально-разностной аппроксимации задачи (1)–(3) на равномерной сетке в прямоугольной области, полученная после стандартного перебора узлов сеточной области спектр симметричной части разностного оператора (4) будет лежать в правой полуплоскости при*

$$\alpha \geqslant -\frac{2\pi^2}{Pe}.$$

ЛИТЕРАТУРА

1. **Вабищевич П.Н., Васильева М.В.** Явно-неявные схемы для задач конвекции-диффузии-реакции // Сиб. журн. вычисл. матем. — 2012. — Т. 15, № 4. — С. 359–369.
2. **Шишкин Г.И.** Первая краевая задача для уравнения второго порядка с малыми параметрами при производных // Дифференциальные уравнения. — 1977. — Т. 13, № 2. — С. 376–378.
3. **Shishkin G.I.** Grid approximation of a singularly perturbed elliptic convection-diffusion equation in an unbounded domain // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 2006. — V. 26, № 1. — P. 67–94.
4. **Shishkin G.I.** Using the technique of majorant functions in approximation of a singular perturbed parabolic convection-diffusion equation on adaptive grids // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 2007. — V. 22, № 3. — P. 263–289.
5. **Krukier L.A.** Convergence acceleration of triangular iterative methods based on the skew-symmetric part of the matrix // Appl. Numer. — 1999. — V. 30. — P. 281–290.
6. **Krukier L.A., Pichugina O.A., Krukier B.L.** Numerical solution of the steady convection-diffusion equation with dominant convection // Procedia Computer Science. — 2013. — V. 18. — P. 2095–2100.
7. **Виноградова С.А., Крукиер Л.А.** Использование метода неполного LU-разложения при моделировании конвективно-диффузионных процессов в анизотропной среде // Математическое моделирование. — 2012. — Т. 24, № 9. — С. 125–136.
8. **Zhang J.** Preconditioned iterative methods and finite difference schemes for convection-diffusion // Appl. Math.& Comp. — 2000. — V. 109. — P. 11–30.
9. **Самарский А.А., Вабищевич П.Н.** Численные методы решения задач конвекции-диффузии. — М.: Эдиториал УРСС, 1999.
10. **Morton K.W.** Numerical solution of convection-diffusion problems. — Chapman and Hall, 1996.
11. **Крукиер Л.А., Мартынова Т.С.** Влияние формы записи уравнения конвекции-диффузии на сходимость метода верхней релаксации // Журнал вычислительной математики и математической физики. — 1999. — Т. 39, № 11. — С. 1821–1827.
12. **Марчук Г. И.** Методы вычислительной математики. — Новосибирск: Наука, 1973.
13. **Самарский А.А., Николаев Е.С.** Методы решения сеточных уравнений. — М: Наука, 1978.

REFERENCES

1. **Vabishchevich P.N., Vasileva M.V.** Explicit-implicit schemes for convection-diffusion-reaction problems // Numerical Analysis and Applications. — 2012. — V. 5, № 4. — P. 297–306.

2. **Shishkin G.I.** First boundary value problem for second-order equations with small parameters at the derivatives [Pervaja kraevaja zadacha dlja uravnenija vtorogo porjadka s malim parametrom pri proizvjdnih] // Differenc. uravnenija. — 1977. — V. 13, № 2. — P. 376—378. (in Russian)
3. **Shishkin G.I.** Grid approximation of a singularly perturbed elliptic convection-diffusion equation in an unbounded domain // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 2006. — V. 26, № 1. — P. 67—94.
4. **Shishkin G.I.** Using the technique of majorant functions in approximation of a singular perturbed parabolic convection-diffusion equation on adaptive grids // Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 2007. — V. 22, № 3. — P. 263—289.
5. **Krukier L.A.** Convergence acceleration of triangular iterative methods based on the skew-symmetric part of the matrix // Appl. Numer. Math. — 1999. — V. 30. — P. 281—290.
6. **Krukier L.A., Pichugina O.A., Krukier B.L.** Numerical solution of the steady convection-diffusion equation with dominant convection // Procedia Computer Science. — 2013. — V. 18. — P. 2095—2100.
7. **Vinogradova S.A., Krukier L.A.** The use of incomplete LU decomposition in modeling convection-diffusion processes in an anisotropic medium // Mathematical Models and Computer Simulations. — 2013. — V. 5, № 2. — P. 190—197.
8. **Zhang J.** Preconditioned iterative methods and finite difference schemes for convection-diffusion // Appl. Math.& Comp. — 2000. — V. 109. — P. 11—30.
9. **Samarskiy A.A., Vabischevich P.N.** Numerical methods for solving convection-diffusion problems [Chislennie metodi reshenija zadach konvekcii-diffussii]. — Moscow: Editorial URSS, 1999. (in Russian)
10. **Morton K.W.** Numerical solution of convection-diffusion problems. — Chapman and Hall, 1996.
11. **Krukier L.A., Martynova T.S.** Influence of the form of convection-diffusion equation on the convergence of the successive over-relaxation method // Computational Mathematics and Mathematical Physics. — 1999. — V. 39, № 11. — P. 1748—1754.
12. **Marchyk G. I.** Methods of Computational Mathematics [Metodi vichislitel'noi matematiki]. — Novosibirsk: Nauka, 1973. (in Russian)
13. **Samarskii A.A., Nikolaev E.S.** Numerical Methods for Grid Equations, V.1 Direct Methods, V.2 Iterative Methods. — Basel, Boston, Berlin: Birkhauser Verlag, 1989. — 242 p., 502 p.